

Promotion IUF 2016
Rapport d'activité (2016-2021)

NOM : ROUSSE

PRÉNOM : Gwenaëlle

DATE DE NAISSANCE : 04/01/1974

GRADE : Maître de Conférences

DISCIPLINE PRINCIPALE : Chimie

CNU : 28

UNIVERSITÉ OU ÉTABLISSEMENT D'APPARTENANCE : Sorbonne Université

UNITÉ DE RECHERCHE D'APPARTENANCE : Chimie du Solide et Energie, UMR 8260

CATÉGORIE : JUNIOR

THÉMATIQUE DE RECHERCHE : CONCEPTION ET SYNTHÈSE DE COMPOSÉS CONDUCTEURS IONIQUES PAR UNE APPROCHE DE CARTES D'ÉNERGIE DE VALENCE DE LIAISONS

RÉSUMÉ SCIENTIFIQUE À PROPOS DE LA RÉALISATION DU PROJET DE RECHERCHE IUF (2 pages maximum) :

Avancées majeures / Etat d'achèvement / réorientations éventuelles au cours des 5 ans / Perspectives ouvertes par le travail réalisé

Le projet s'est déroulé conformément aux espérances. Sur les six années 2016-2021, j'ai publié 79 articles dont 9 sont en lien direct avec le projet annoncé. Ces neuf publications sont indiquées sur fond grisé dans la liste de production scientifique ci-après. Les autres papiers que j'ai publiés sont issus de projets menés en parallèle, et concernent principalement l'étude de composés d'électrodes pour batteries, soit sur le plan de l'insertion/extraction électrochimique ou chimique du lithium, soit pour leurs propriétés physiques (propriétés magnétiques, et structures magnétiques par diffraction de neutrons).

Avancées Majeures :

Nous avons développé un outil d'exploration et d'apprentissage assisté (« machine learning ») permettant d'identifier rapidement dans les bases de données cristallographiques les structures potentiellement intéressantes comme conducteur ioniques, afin de les envisager comme électrolyte solide dans les batteries tout solide. Cette collaboration avec le CIC Energigune (Vitoria-Gasteiz, Espagne) et l'Institut Laue-Langevin (Grenoble, France) a donné lieu à un papier publié dans *Journal of Applied Crystallography* en 2018 [référence 48].

L'étude de nouveaux conducteurs ioniques a été poursuivie sur le point de vue expérimental, principalement au travers du post-doctorat d'Ignacio Blasquez-Alcover et de la thèse de Sujoy Saha. Deux approches ont été menées :

- une dirigée vers la synthèse de composés sulfures, avec l'étude de composés de type $(\text{Li})\text{TiS}_x$ ($2 \leq x \leq 3$), de structure lamellaires ou tridimensionnelle. L'impact de la substitution du titane par du fer a été étudié et permet d'envisager d'utiliser ce composé dans des batteries tout solides [références 58, 75 et 77]. L'influence de la présence de sulfures dimères et du rédox anionique a été estimé.
- Le deuxième axe a été de poursuivre des recherches sur des oxydes, qui sont plus faciles à manipuler que les sulfures sensibles à l'air. Pour pallier à leur conductivité ionique généralement inférieure, nous nous sommes tournés vers des composés de type phosphate pour lesquels nous avons mis en évidence, via des techniques de diffraction à rayons X et de neutrons, des mécanismes de « paddle wheel » qui amplifient la conduction ionique. Il s'agit de la mise en rotation de groupements tétraédriques PO_4 accompagnant la diffusion des ions Li^+ . Ces résultats sont détaillés dans les références 39, 50 et 67.

Perspectives ouvertes :

La recherche menée ces cinq dernières années dans le cadre du projet IUF a permis d'ouvrir des portes vers la maîtrise des interfaces dans le cadre des batteries tout-solide, notamment en envisageant de n'utiliser que des sulfures comme composés d'électrode positive et comme électrolyte solide, diminuant ainsi les problèmes de compatibilité chimique et réduisant le blocage de la diffusion aux interfaces. Les recherches vont se poursuivre vers d'autres composés sulfures, non plus à base de titane mais à base d'autres éléments de type zirconium ou étain, et vers des composés sélénures et tellures (thèse de Jacques Louis, en cours).

PRODUCTION SCIENTIFIQUE DE LA PÉRIODE 2016-2021 :

Publications scientifiques

Sont écrits sur fond grisé les papiers en lien direct avec le projet IUF.

- 80 Koç, T.; Marchini, F.; Rouse, G.; Dugas, R.; Tarascon, J.-M. In Search of the Best Solid Electrolyte-Layered Oxide Pairing for Assembling Practical All-Solid-State Batteries. *ACS Appl. Energy Mater.* **2021**. <https://doi.org/10.1021/acsaem.1c02187>.
- 79 Marchandier, T.; Dubouis, N.; Fauth, F.; Avdeev, M.; Grimaud, A.; Tarascon, J.-M.; Rouse, G. Crystallographic and Magnetic Structures of the VI_3 and LiV_3 van Der Waals Compounds. *Phys. Rev. B* **2021**, *104* (1), 014105. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.104.014105>.
- 78 Li, B.; Sougrati, M. T.; Rouse, G.; Morozov, A. V.; Dedryvère, R.; Iadecola, A.; Senyshyn, A.; Zhang, L.; Abakumov, A. M.; Doublet, M.-L.; Tarascon, J.-M. Correlating Ligand-to-Metal Charge Transfer with Voltage Hysteresis in a Li-Rich Rock-Salt Compound Exhibiting Anionic Redox. *Nat. Chem.* **2021**, *13* (11), 1070–1080. <https://doi.org/10.1038/s41557-021-00775-2>.
- 77 Leube, B. T.; Robert, C.; Foix, D.; Porcheron, B.; Dedryvère, R.; Rouse, G.; Salager, E.; Cabelguen, P.-E.; Abakumov, A. M.; Vezin, H.; Doublet, M.-L.; Tarascon, J.-M. Activation of Anionic Redox in d^0 Transition Metal Chalcogenides by Anion Doping. *Nat Commun* **2021**, *12* (1), 5485. <https://doi.org/10.1038/s41467-021-25760-8>.

- 76 Berthelot, R.; Serrano-Sevillano, J.; Fraisse, B.; Fauth, F.; Weill, F.; Laurencin, D.; Casas-Cabanas, M.; Carlier, D.; Rousse, G.; Doublet, M.-L. Stacking Versatility in Alkali-Mixed Honeycomb Layered $\text{NaNi}_2\text{TeO}_6$. *Inorg. Chem.* **2021**, *60* (18), 14310–14317. <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.1c01876>.
- 75 Marchini, F.; Porcheron, B.; Rousse, G.; Albero Blanquer, L.; Droguet, L.; Foix, D.; Koç, T.; Deschamps, M.; Tarascon, J. M. The Hidden Side of Nanoporous $\beta\text{-Li}_3\text{PS}_4$ Solid Electrolyte. *Advanced Energy Materials* **2021**, *11* (34), 2101111. <https://doi.org/10.1002/aenm.202101111>.
- 74 Dubouis, N.; Marchandier, T.; Rousse, G.; Marchini, F.; Fauth, F.; Avdeev, M.; Iadecola, A.; Porcheron, B.; Deschamps, M.; Tarascon, J.-M.; Grimaud, A. Extending Insertion Electrochemistry to Soluble Layered Halides with Superconcentrated Electrolytes. *Nat. Mater.* **2021**, *20* (11), 1545–1550. <https://doi.org/10.1038/s41563-021-01060-w>.
- 73 Bregiroux, D.; Bahezre, A.; Allani, M.; Rousse, G.; Wallez, G.; Laberty-Robert, C. Dysprosium Doping of Ca_2MnO_4 : Effect on Crystal Structure at Room Temperature and Thermal Behavior. *Materials Chemistry and Physics* **2021**, *267*, 124670. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2021.124670>.
- 72 Petit, S.; Thomas, C.; Millot, Y.; Averseng, F.; Brouri, D.; Krafft, J.; Dzwigaj, S.; Rousse, G.; Laberty-Robert, C.; Costentin, G. Synergistic Effect Between $\text{Ca}_4\text{V}_4\text{O}_{14}$ and Vanadium-Substituted Hydroxyapatite in the Oxidative Dehydrogenation of Propane. *ChemCatChem* **2021**, *13* (18), 3995. <https://doi.org/10.1002/cctc.202100807>.
- 71 Delacroix, S.; Igoa, F.; Song, Y.; Le Godec, Y.; Coelho-Diogo, C.; Gervais, C.; Rousse, G.; Portehault, D. Electron Precise Sodium Carbaboride Nanocrystals from Molten Salts: Single Sources to Boron Carbides. *Inorganic Chemistry*. **2021**, *60* (7), 4252–4260. <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.0c03501>.
- 70 Wang, Q.; Mariyappan, S.; Rousse, G.; Morozov, A. V.; Porcheron, B.; Dedryvère, R.; Wu, J.; Yang, W.; Zhang, L.; Chakir, M.; Avdeev, M.; Deschamps, M.; Yu, Y.-S.; Cabana, J.; Doublet, M.-L.; Abakumov, A. M.; Tarascon, J.-M. Unlocking Anionic Redox Activity in O3-Type Sodium 3d Layered Oxides via Li Substitution. *Nature Materials* **2021**, *20* (3), 353–361. <https://doi.org/10.1038/s41563-020-00870-8>.
- 69 Varela, Aurea, Isabel Gómez-Recio, Laura Serrador, María Hernando, Emilio Matesanz, Almudena Torres-Pardo, María Teresa Fernández-Díaz, et al. « Hydroxyapatites as Versatile Inorganic Hosts of Unusual Pentavalent Manganese Cations ». *Chemistry of Materials* *32*, n° 24 (22 décembre 2020): 10584-93. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.0c03673>.
- 68 Marchandier, Thomas,* Gwenaëlle Rousse, Quentin Jacquet, Artem M. Abakumov, François Fauth, Claire V. Colin, et Jean-Marie Tarascon. « Magnetic and Intercalation Properties of BaRu_2O_6 and SrRu_2O_6 ». *Chemistry of Materials*, 21 août 2020. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.0c02469>.
- 67 Saha, Sujoy,* Gwenaëlle Rousse, Matthieu Courty, Yaroslava Shakhova, Maria Kirsanova, François Fauth, Vladimir Pomjakushin, Artem M. Abakumov, et J. M. Tarascon. « Structural Polymorphism in $\text{Na}_4\text{Zn}(\text{PO}_4)_2$ Driven by Rotational Order–Disorder Transitions and the Impact of Heterovalent Substitutions on Na-Ion Conductivity ». *Inorganic Chemistry* *59*, n° 9 (4 mai 2020): 6528-40. <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.0c00612>.
- 66 Zhang, Ronghuang, Paul E. Pearce, Vanessa Pimenta, Jordi Cabana, Heifang Li, Daniel Alves Dalla Corte, Artem M. Abakumov, et al. « First Example of Protonation of Ruddlesden–Popper Sr_2IrO_4 : A Route to Enhanced Water Oxidation Catalysts ». *Chemistry of Materials* *32*, n° 8 (28 avril 2020): 3499-3509. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.0c00432>.
- 65 Yin, Alexis Grimaud, Gwenaëlle Rousse, Artem Abakumov, Anatoliy Senyshyn, Leiting Zhang, Sigita Trabesinger, Antonella Iadecola, Dominique Foix, Domitille Giaume, and Jean-Marie Tarascon, « Structural evolution at the oxidative and reductive limits in the first electrochemical cycle of $\text{Li}_{1.2}\text{Ni}_{0.13}\text{Mn}_{0.54}\text{Co}_{0.13}\text{O}_2$ », *Nature Communications*, 2020, *11* (1), 1252. <https://doi.org/10.1038/s41467-020-14927-4>.

- 64 Chunzhen Yang, Gwenaëlle Rousse, Katrine Svane, Paul Pearce, Artem Abakumov, Michael Deschamps, Giannantonio Cibin, Alan Chadwick, Daniel Alves Dalla Corte, Heine Hansen, Tejs Vegge, Jean-Marie Tarascon, and Alexis Grimaud, « Cation Insertion to Break the Activity/Stability Relationship for Highly Active Oxygen Evolution Reaction Catalyst », *Nature Communications*, 2020, 11 (1), 1378. <https://doi.org/10.1038/s41467-020-15231-x>.
- 63 Mariyappan, Sathiya, Thomas Marchandier,* François Rabuel, Antonella Iadecola, Gwenaëlle Rousse, Anatoly V. Morozov, Artem M. Abakumov, et Jean-Marie Tarascon. « The Role of Divalent ($Zn^{2+}/Mg^{2+}/Cu^{2+}$) Substituents in Achieving Full Capacity of Sodium Layered Oxides for Na-Ion Battery Applications ». *Chemistry of Materials* 32, n° 4 (25 février 2020): 1657-66. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.9b05205>.
- 62 Ghosh, Subham, Nabadyuti Barman, Madhulika Mazumder, Swapan K. Pati, Gwenaëlle Rousse, et Premkumar Senguttuvan. « High Capacity and High-Rate NASICON- $Na_{3.75}V_{1.25}Mn_{0.75}(PO_4)_3$ Cathode for Na-Ion Batteries via Modulating Electronic and Crystal Structures ». *Advanced Energy Materials* 10, n° 6 (2020): 1902918. <https://doi.org/10.1002/aenm.201902918>.
- 61 Pearce, Paul E.,* Gaurav Assat, Antonella Iadecola, François Fauth, Rémi Dedryvère, Artem Abakumov, Gwenaëlle Rousse, et Jean-Marie Tarascon. « Anionic and Cationic Redox Processes in β - Li_2IrO_3 and Their Structural Implications on Electrochemical Cycling in a Li-Ion Cell ». *The Journal of Physical Chemistry C* 124, n° 5 (6 février 2020): 2771-81. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b10195>.
- 60 Lamaison, Sarah, David Wakerley, Juliette Blanchard, David Montero, Gwenaëlle Rousse, Dimitri Mercier, Philippe Marcus, et al. « High-Current-Density CO_2 -to- CO Electroreduction on Ag-Alloyed Zn Dendrites at Elevated Pressure ». *Joule* 4, n° 2 (19 février 2020): 395-406. <https://doi.org/10.1016/j.joule.2019.11.014>.
- 59 Marchandier, Thomas,* Quentin Jacquet,* Gwenaëlle Rousse, Benoît Baptiste, Artem M. Abakumov, et Jean-Marie Tarascon. « Expanding the Rich Crystal Chemistry of Ruthenium(V) Oxides via the Discovery of $BaRu_2O_6$, $Ba_5Ru_4O_{15}$, $Ba_2Ru_3O_{10}$, and $Sr_2Ru_3O_9(OH)$ by pH-Controlled Hydrothermal Synthesis ». *Chemistry of Materials* 31, n° 16 (2019): 6295-6305. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.9b02510>.
- 58 Saha, Sujoy,* Gaurav Assat, Moulay Tahar Sougrati, Dominique Foix, Haifeng Li, Jean Vergnet, Soma Turi, Gwenaëlle Rousse et al. « Exploring the Bottlenecks of Anionic Redox in Li-Rich Layered Sulfides ». *Nature Energy* 4, n° 11 (2019): 977-87. <https://doi.org/10.1038/s41560-019-0493-0>.
- 57 Perez, Arnaud J.,* Gwenaëlle Rousse, et Jean-Marie Tarascon. « Structural Instability Driven by Li/Na Competition in $Na(Li_{1/3}Ir_{2/3})O_2$ Cathode Material for Li-Ion and Na-Ion Batteries ». *Inorganic Chemistry* 58, n° 22 (2019): 15644-51. <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.9b02722>.
- 56 Pearce, Paul E.,* Chunzhen Yang, Antonella Iadecola, Juan Rodriguez-Carvajal, Gwenaëlle Rousse, Rémi Dedryvère, Artem M. Abakumov, et al. « Revealing the Reactivity of the Iridium Trioxide Intermediate for the Oxygen Evolution Reaction in Acidic Media ». *Chemistry of Materials* 31, n° 15 (2019): 5845-55. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.9b01976>.
- 55 Jacquet, Quentin,* Antonella Iadecola, Matthieu Saubanère, Haifeng Li, Erik. J. Berg, Gwenaëlle Rousse, Jordi Cabana, Marie-Liesse Doublet, et Jean-Marie Tarascon. « Charge Transfer Band Gap as an Indicator of Hysteresis in Li-Disordered Rock Salt Cathodes for Li-Ion Batteries ». *Journal of the American Chemical Society* 141, n° 29 (2019): 11452-64. <https://doi.org/10.1021/jacs.8b11413>.
- 54 Vallée, Coélio, Matthieu Saubanère, Paula Sanz-Camacho, Yohan Biecher, Bernard Fraise, Emmanuelle Suard, Gwenaëlle Rousse, Dany Carlier, et Romain Berthelot. « Alkali-Glass Behavior in Honeycomb-Type Layered $Li_{3-x}Na_xNi_2SbO_6$ Solid Solution ». *Inorganic Chemistry* 58, n° 17 (2019): 11546-52. <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.9b01385>.
- 53 Wang, Qing, Sathiya Mariyappan, Jean Vergnet, Artem M. Abakumov, Gwenaëlle Rousse, François Rabuel, Mohamed Chakir, et Jean-Marie Tarascon. « Reaching the Energy Density Limit of Layered

O3-NaNi_{0.5}Mn_{0.5}O₂ Electrodes via Dual Cu and Ti Substitution ». *Advanced Energy Materials* 9, n° 36 (2019): 1901785. <https://doi.org/10.1002/aenm.201901785>.

- 52 Otoyama, M., Jacquet, Q.*, Iadecola, A., Saubanère, M., Rousse, G., and Tarascon, J.-M. "Synthesis and Electrochemical Activity of some Na(Li)-Rich Ruthenium Oxides with the feasibility to stabilize Ru⁶⁺" *Advanced Energy Materials* 9, n° 15 (2019): 1803674
- 51 Vaccarelli, O.*, Honecker, A., Giura, P., Béneut, K., Fåk, B., Rousse, G. and Radtke G. "Triplet excitations in the frustrated spin ladder Li₂Cu₂O(SO₄)₂" *Physical Review B* 99, 6 (2019): 064416. doi:[10.1103/PhysRevB.99.064416](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.064416)
- 50 Saha, S.*, Rousse, G., Fauth, F., Pomjakushin, V., and Tarascon, J.-M. "Influence of Temperature-Driven Polymorphism and Disorder on Ionic Conductivity in Li₆Zn(P₂O₇)₂" *Inorganic Chemistry* 58, no. 3 (2019): 1774–1781. doi:[10.1021/acs.inorgchem.8b01800](https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.8b01800)
- 49 Yan, G., Mariyappan, S., Rousse, G., Jacquet, Q., Deschamps, M., David, R., Mirvaux, B., Freeland, J. W., and Tarascon, J.-M. "Higher Energy and Safer Sodium Ion Batteries via an Electrochemically Made Disordered Na₃V₂(PO₄)₂F₃ Material" *Nature Communications* 10, no. 1 (2019): 585. doi:[10.1038/s41467-019-08359-y](https://doi.org/10.1038/s41467-019-08359-y) IF = 12
- 48 Katcho, N. A., Carrete, J., Reynaud, M., Rousse, G., Casas-Cabanas, M., Mingo, N., Rodríguez-Carvajal, J., and Carrasco, J. "An Investigation of the Structural Properties of Li and Na Fast Ion Conductors Using High-Throughput Bond-Valence Calculations and Machine Learning" *Journal of Applied Crystallography* 52, no. 1 (2019): 148–157. doi:[10.1107/S1600576718018484](https://doi.org/10.1107/S1600576718018484)
- 47 Lamaison, S., Wakerley, D., Montero, D., Rousse, G., Taverna, D., Giaume, D., Mercier, D., Blanchard, J., Tran, H. N., Fontecave, M., and Mougél, V. "Zn-Cu Alloy Nanofoams as Efficient Catalysts for the Reduction of CO₂ to Syngas Mixtures with a Potential-Independent H₂/CO Ratio" *ChemSusChem* 12, no. 2 (2019): 511–517. doi:[10.1002/cssc.201802287](https://doi.org/10.1002/cssc.201802287)
- 46 Hallopeau, L., Bregiroux, D., Rousse, G., Portehault, D., Stevens, P., Toussaint, G., and Laberty-Robert, C. "Microwave-Assisted Reactive Sintering and Lithium Ion Conductivity of Li_{1.3}Al_{0.3}Ti_{1.7}(PO₄)₃ Solid Electrolyte" *Journal of Power Sources* 378, (2018): 48–52. doi:[10.1016/j.jpowsour.2017.12.021](https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2017.12.021)
- 45 Jacquet, Q.*, Iadecola, A., Saubanère, M., Lemarquis, L., Berg, E. J., Alves Dalla Corte, D., Rousse, G., Doublet, M.-L., and Tarascon, J.-M. "Competition between Metal Dissolution and Gas Release in Li-Rich Li₃Ru_yIr_{1-y}O₄ Model Compounds Showing Anionic Redox" *Chemistry of Materials* 30, no. 21 (2018): 7682–7690. doi:[10.1021/acs.chemmater.8b02955](https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.8b02955)
- 44 Strauss, F.*, Rousse, G., Alves Dalla Corte, D., Giacobbe, C., Dominko, R., and Tarascon, J.-M. "Impact of Structural Polymorphism on Ionic Conductivity in Lithium Copper Pyroborate Li₆CuB₄O₁₀" *Inorganic Chemistry* 57, no. 18 (2018): 11646–11654. doi:[10.1021/acs.inorgchem.8b01785](https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.8b01785)
- 43 Verger, L., Dargaud, O., Rousse, G., and Cormier, L. "Reactivity of Chromium-Based Pigments in a Porcelain Glaze" *Comptes Rendus Physique* 19, no. 7 (2018): 589–598. doi:[10.1016/j.crhy.2018.09.008](https://doi.org/10.1016/j.crhy.2018.09.008)
- 42 Yang, C., Batuk, M., Jacquet, Q., Rousse, G., Yin, W., Zhang, L., Hadermann, J., Abakumov, A. M., Cibin, G., Chadwick, A., Tarascon, J.-M., and Grimaud, A. "Revealing PH-Dependent Activities and Surface Instabilities for Ni-Based Electrocatalysts during the Oxygen Evolution Reaction" *ACS Energy Letters* 3, no. 12 (2018): 2884–2890. doi:[10.1021/acsenergylett.8b01818](https://doi.org/10.1021/acsenergylett.8b01818)
- 41 Pearce, P. E.*, Rousse, G., Karakulina, O. M., Hadermann, J., Van Tendeloo, G., Foix, D., Fauth, F., Abakumov, A. M., and Tarascon, J.-M. "β-Na_{1.7}IrO₃: A Tridimensional Na-Ion Insertion Material with a Redox Active Oxygen Network" *Chemistry of Materials* 30, no. 10 (2018): 3285–3293. doi:[10.1021/acs.chemmater.8b00320](https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.8b00320)
- 40 Grimaud, A., Iadecola, A., Batuk, D., Saubanère, M., Abakumov, A. M., Freeland, J. W., Cabana, J., Li, H., Doublet, M.-L., Rousse, G., and Tarascon, J.-M. "Chemical Activity of the Peroxide/Oxide Redox

Couple: Case Study of Ba₅Ru₂O₁₁ in Aqueous and Organic Solvents” *Chemistry of Materials* 30, no. 11 (2018): 3882–3893. doi:[10.1021/acs.chemmater.8b01372](https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.8b01372)

- 39 Saha, S.*, [Rousse, G.](#), Alcover, I. B., Courty, M., Dalla Corte, D. A., and Tarascon, J.-M. “Polymorphism in Li₄Zn(PO₄)₂ and Stabilization of Its Structural Disorder to Improve Ionic Conductivity” *Chemistry of Materials* 30, no. 4 (2018): 1379–1390. doi:[10.1021/acs.chemmater.7b05139](https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.7b05139)
- 38 Strauss, F.*, [Rousse, G.](#), Batuk, D., Tang, M., Salager, E., Dražić, G., Dominko, R., and Tarascon, J.-M. “Electrochemical Behavior of Bi₄B₂O₉ towards Lithium-Reversible Conversion Reactions without Nanosizing” *Physical Chemistry Chemical Physics* 20, no. 4 (2018): 2330–2338. doi:[10.1039/C7CP07693B](https://doi.org/10.1039/C7CP07693B)
- 37 Jacquet, Q.*, [Rousse, G.](#), Iadecola, A., Saubanère, M., Doublet, M.-L., and Tarascon, J.-M. “Electrostatic Interactions versus Second Order Jahn–Teller Distortion as the Source of Structural Diversity in Li₃MO₄ Compounds (M = Ru, Nb, Sb and Ta)” *Chemistry of Materials* 30, no. 2 (2018): 392–402. doi:[10.1021/acs.chemmater.7b04117](https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.7b04117)
- 36 Verger, L., Dargaud, O., Chassé, M., Trcera, N., [Rousse, G.](#), and Cormier, L. “Synthesis, Properties and Uses of Chromium-Based Pigments from the Manufacture de Sèvres” *Journal of Cultural Heritage* 30, (2018): 26–33. doi:[10.1016/j.culher.2017.09.012](https://doi.org/10.1016/j.culher.2017.09.012)
- 35 Vaccarelli, O.*, [Rousse, G.](#), Saúl, A., and Radtke, G. “Magnetic Dimerization in the Frustrated Spin Ladder Li₂Cu₂O(SO₄)₂” *Physical Review B* 96, no. 18 (2017): 180406(R). doi:[10.1103/PhysRevB.96.180406](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.180406)
- 34 [Rousse, G.](#), Rodríguez-Carvajal, J., Giacobbe, C., Sun, M., Vaccarelli, O., and Radtke, G. “Low-Temperature Structural Transition in the Quasi-One-Dimensional Spin- 1/2 Compound Li₂Cu₂O(SO₄)₂” *Physical Review B* 95, no. 14 (2017): 144103. doi:[10.1103/PhysRevB.95.144103](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.144103)
- 33 [Rousse, G.](#), Ahouari, H., Pomjakushin, V., Tarascon, J.-M., Recham, N., and Abakumov, A. M. “Denticity and Mobility of the Carbonate Groups in AMCO₃F Fluorocarbonates: A Study on KMnCO₃F and High Temperature KCaCO₃F Polymorph” *Inorganic Chemistry* 56, no. 21 (2017): 13132–13139. doi:[10.1021/acs.inorgchem.7b01926](https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.7b01926)
- 32 Jacquet, Q.*, Perez, A.*, Batuk, D., Van Tendeloo, G., Rousse, G., and Tarascon, J.-M. “The Li₃Ru_yNb_{1-y}O₄ (0 ≤ y ≤ 1) System: Structural Diversity and Li Insertion and Extraction Capabilities” *Chemistry of Materials* 29, no. 12 (2017): 5331–5343. doi:[10.1021/acs.chemmater.7b01511](https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.7b01511)
- 31 Pearce, P. E.*, Perez, A. J., [Rousse, G.](#), Saubanère, M., Batuk, D., Foix, D., McCalla, E., Abakumov, A. M., Van Tendeloo, G., Doublet, M.-L., and Tarascon, J.-M. “Evidence for Anionic Redox Activity in a Tridimensional-Ordered Li-Rich Positive Electrode β-Li₂IrO₃” *Nature Materials* 16, no. 5 (2017): 580–586. doi:[10.1038/nmat4864](https://doi.org/10.1038/nmat4864)
- 30 Perez, A. J.*, Jacquet, Q.*, Batuk, D., Iadecola, A., Saubanère, M., [Rousse, G.](#), Larcher, D., Vezin, H., Doublet, M.-L., and Tarascon, J.-M. “Approaching the Limits of Cationic and Anionic Electrochemical Activity with the Li-Rich Layered Rocksalt Li₃IrO₄” *Nature Energy* 2, no. 12 (2017): 954–962. doi:[10.1038/s41560-017-0042-7](https://doi.org/10.1038/s41560-017-0042-7)
- 29 Petit, S., Gode, T., Thomas, C., Dzwigaj, S., Millot, Y., Brouri, D., Krafft, J.-M., [Rousse, G.](#), Laberty-Robert, C., and Costentin, G. “Incorporation of Vanadium into the Framework of Hydroxyapatites: Importance of the Vanadium Content and PH Conditions during the Precipitation Step” *Phys. Chem. Chem. Phys.* 19, no. 14 (2017): 9630–9640. doi:[10.1039/C6CP08782E](https://doi.org/10.1039/C6CP08782E)
- 28 Hallopeau, L., Bregiroux, D., [Rousse, G.](#), Portehault, D., Stevens, P., Toussaint, G., and Laberty-Robert, C. “Microwave-Assisted Reactive Sintering and Lithium Ion Conductivity of Li_{1.3}Al_{0.3}Ti_{1.7}(PO₄)₃ Solid Electrolyte” *Journal of Power Sources* 378, (2018): 48–52. doi:[10.1016/j.jpowsour.2017.12.021](https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2017.12.021)
- 27 Bellin, C., Mafety, A., Narayana, C., Giura, P., [Rousse, G.](#), Itié, J.-P., Polian, A., Saitta, A. M., and Shukla, A. “Disorder-Order Phase Transition at High Pressure in Ammonium Fluoride” *Physical Review*

- 26 Blazquez-Alcover, I.*; [Rousse, G.](#), Alves Dalla Corte, D., Badot, J. C., Grimaud, A., Rozier, P., and Tarascon, J. M. "Improving Ionic Conductivity by Mg-Doping of A_2SnO_3 ($A = Li^+, Na^+$)" *Solid State Ionics* 308, (2017): 16–21. doi:[10.1016/j.ssi.2017.05.013](https://doi.org/10.1016/j.ssi.2017.05.013)
- 25 Federicci, R., Baptiste, B., Finocchi, F., Popa, F., Brohan, L., Béneut, K., Giura, P., [Rousse, G.](#), Descamps-Mandine, A., Douillard, T., Shukla, A., and Leridon, B. "The Crystal Structure of $Rb_2Ti_2O_5$ " *Acta Crystallographica Section B Structural Science, Crystal Engineering and Materials* 73, no. 6 (2017): 1142–1150. doi:[10.1107/S2052520617013646](https://doi.org/10.1107/S2052520617013646)
- 24 Gomez, G. E., Brusau, E. V., Kaczmarek, A. M., Mellot-Draznieks, C., Sacanell, J., [Rousse, G.](#), Van Deun, R., Sanchez, C., Narda, G. E., and Soler Illia, G. J. A. A. "Flexible Ligand-Based Lanthanide Three-Dimensional Metal-Organic Frameworks with Tunable Solid-State Photoluminescence and OH-Solvent-Sensing Properties: Flexible Ligand-Based Lanthanide Three-Dimensional Metal-Organic Frameworks with Tunable Solid-State Photoluminescence and OH-Solvent-Sensing Properties" *European Journal of Inorganic Chemistry* 2017, no. 17 (2017): 2321–2331. doi:[10.1002/ejic.201700099](https://doi.org/10.1002/ejic.201700099)
- 23 Huan, T. N., [Rousse, G.](#), Zanna, S., Lucas, I. T., Xu, X., Menguy, N., Mougél, V., and Fontecave, M. "A Dendritic Nanostructured Copper Oxide Electrocatalyst for the Oxygen Evolution Reaction" *Angewandte Chemie International Edition* 56, no. 17 (2017): 4792–4796. doi:[10.1002/anie.201700388](https://doi.org/10.1002/anie.201700388)
- 22 Pearce, P. E.*; Perez, A. J. *; [Rousse, G.](#); Saubanere, M.; Batuk, D.; Foix, D.; McCalla, E.; Abakumov, A.; van Tendeloo, G.; Doublet, M.-L.; Tarascon, J.-M. "Evidence for Anionic Redox Activity in a Tridimensional-Ordered Li-Rich Positive Electrode β - Li_2IrO_3 ". *Nature Materials* 2017 16, no. 5 (2017): 580–586. doi:[10.1038/nmat4864](https://doi.org/10.1038/nmat4864).
- 21 Verger, L.; Dargaud, O.; [Rousse, G.](#); Cotte, M.; Cormier, L. "The Stability of Gahnite Doped with Chromium Pigments in Glazes from the French Manufacture of Sèvres." *Journal of the American Ceramic Society* 2017, 100 (1), 86–95 DOI: 10.1111/jace.14452.
- 20 Lander, L. *; [Rousse, G.](#); Batuk, D.; Colin, C. V.; Dalla Corte, D. A.; Tarascon, J.-M. "Synthesis, Structure, and Electrochemical Properties of K-Based Sulfates $K_2M_2(SO_4)_3$ with $M = Fe$ and Cu ." *Inorganic Chemistry* 2017, 56 (4), 2013–2021 DOI: 10.1021/acs.inorgchem.6b02526.
- 19 Huan, T. N.; Simon, P.; [Rousse, G.](#); Génois, I.; Artero, V.; Fontecave, M. "Porous Dendritic Copper: An Electrocatalyst for Highly Selective CO_2 Reduction to Formate in Water/Ionic Liquid Electrolyte." *Chem. Sci.* 2017, 8 (1), 742–747 DOI: 10.1039/C6SC03194C.
- 18 Huan, T. N.; Ranjbar, N.; [Rousse, G.](#); Sougrati, M. T.; Zitolo, A.; Mougél, V.; Jaouen, F.; Fontecave, M. "Electrochemical Reduction of CO_2 Catalyzed by Fe-N-C Materials: A Structure-Selectivity Study." *ACS Catalysis* 2017, 1520–1525 DOI: 10.1021/acscatal.6b03353. DOI: 10.1021/acscatal.6b03353.
- 17 Thi N'Goc, H. L.; Mouafo, L. D. N.; Etrillard, C.; Torres-Pardo, A.; Dayen, J.-F.; Rano, S.; [Rousse, G.](#); Laberty-Robert, C.; Calbet, J. G.; Drillon, M.; Sanchez, C.; Doudin, B.; Portehault, D. "Surface-Driven Magnetotransport in Perovskite Nanocrystals." *Advanced Materials* 2016, 1604745 DOI: 10.1002/adma.201604745.
- 16 Zhang, B.*; [Rousse, G.](#), Foix, D., Dugas, R., Corte, D. A. D., and Tarascon, J.-M. "Microsized Sn as Advanced Anodes in Glyme-Based Electrolyte for Na-Ion Batteries" *Advanced Materials* 28, no. 44 (2016): 9824–9830. doi:[10.1002/adma.201603212](https://doi.org/10.1002/adma.201603212)
- 15 Zhang, B.*; Dugas, R., [Rousse, G.](#), Rozier, P., Abakumov, A. M., and Tarascon, J.-M. "Insertion Compounds and Composites Made by Ball Milling for Advanced Sodium-Ion Batteries" *Nature Communications* 7, (2016): 10308. doi:[10.1038/ncomms10308](https://doi.org/10.1038/ncomms10308)

- 14 Verger, L., Dargaud, O., Rousse, G., Rozsályi, E., Juhin, A., Cabaret, D., Cotte, M., Glatzel, P., and Cormier, L. "Spectroscopic properties of Cr³⁺ in the spinel solid solution ZnAl_{2-x}Cr_xO₄" *Physics and Chemistry of Minerals* 43, no. 1 (2016): 33–42. doi:10.1007/s00269-015-0771-8
- 13 Sun, M.*, Rousse, G., Saubanère, M., Doublet, M.-L., Dalla Corte, D., and Tarascon, J.-M. "A₂VO(SO₄)₂ (A = Li, Na) as Electrodes for Li-Ion and Na-Ion Batteries" *Chemistry of Materials* 28, no. 18 (2016): 6637–6643. doi:10.1021/acs.chemmater.6b02759
- 12 Sun, M.*, Rousse, G., Corte, D. D., Saubanère, M., Doublet, M.-L., and Tarascon, J.-M. "A Fully Ordered Triplite, LiCuSO₄F" *Chemistry of Materials* 28, no. 6 (2016): 1607–1610. doi:10.1021/acs.chemmater.5b04478
- 11 Strauss, F.*, Rousse, G., Sougrati, M. T., Dalla Corte, D. A., Courty, M., Dominko, R., and Tarascon, J.-M. "Synthesis, Structure, and Electrochemical Properties of Na₃MB₅O₁₀ (M = Fe, Co) Containing M²⁺ in Tetrahedral Coordination" *Inorganic Chemistry* (2016): doi:10.1021/acs.inorgchem.6b02070, Available at <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.inorgchem.6b02070>
- 10 Strauss, F.*, Rousse, G., Alves Dalla Corte, D., Ben Hassine, M., Saubanère, M., Tang, M., Vezin, H., Courty, M., Dominko, R., and Tarascon, J.-M. "Electrochemical Activity and High Ionic Conductivity of Lithium Copper Pyroborate Li₆CuB₄O₁₀" *Phys. Chem. Chem. Phys.* 18, no. 22 (2016): 14960–14969. doi:10.1039/C6CP01581F
- 9 Shivaramaiah, R., Lander, L.*, Nagabhushana, G. P., Rousse, G., Tarascon, J.-M., and Navrotsky, A. "Thermodynamic Properties of Polymorphs of Fluorosulfate Based Cathode Materials with Exchangeable Potassium Ions" *ChemPhysChem* (2016): doi:10.1002/cphc.201600960, Available at <http://doi.wiley.com/10.1002/cphc.201600960>
- 8 Rousse, G. and Rodríguez-Carvajal, J. "Oxalate-Mediated Long-Range Antiferromagnetism Order in Fe₂(C₂O₄)₃·4H₂O" *Dalton Trans.* (2016), 45, 14311–14319 doi:10.1039/C6DT02740G, Available at <http://xlink.rsc.org/?DOI=C6DT02740G>
- 7 Rousse, G., Radtke, G., Klein, Y., and Ahouari, H. "Long-Range Antiferromagnetic Order in Malonate-Based Compounds Na₂M(H₂C₃O₄)₂·2H₂O (M = Mn, Fe, Co, Ni)" *Dalton Trans.* 45, no. 6 (2016): 2536–2548. doi:10.1039/C5DT04527D
- 6 Perez, A. J.*, Batuk, D., Saubanère, M., Rousse, G., Foix, D., McCalla, E., Berg, E. J., Dugas, R., H. W. van den Bos, K., Doublet, M.-L., Gonbeau, D., Abakumov, A. M., Van Tendeloo, G., and Tarascon, J.-M. "Strong Oxygen Participation in the Redox Governing the Structural and Electrochemical Properties of Na-Rich Layered Oxide Na₂IrO₃" *Chemistry of Materials* 28, no. 22 (2016): 8278–8288. doi:10.1021/acs.chemmater.6b03338
- 5 Lander, L.*, Reynaud, M.*, Rodríguez-Carvajal, J., Tarascon, J.-M., and Rousse, G. "Magnetic Structures of Orthorhombic Li₂M(SO₄)₂ (M = Co, Fe) and Li_xFe(SO₄)₂ (X = 1, 1.5) Phases" *Inorganic Chemistry* 55, no. 22 (2016): 11760–11769. doi:10.1021/acs.inorgchem.6b01844
- 4 Lander, L.*, Reynaud, M.*, Carrasco, J., Katcho, N. A., Bellin, C., Polian, A., Baptiste, B., Rousse, G., and Tarascon, J.-M. "Unveiling the Electrochemical Mechanisms of Li₂Fe(SO₄)₂ Polymorphs by Neutron Diffraction and Density Functional Theory Calculations" *Phys. Chem. Chem. Phys.* 18, no. 21 (2016): 14509–14519. doi:10.1039/C6CP02175A
- 3 Huan, T. N., Prakash, P., Simon, P., Rousse, G., Xu, X., Artero, V., Gravel, E., Doris, E., and Fontecave, M. "CO₂ Reduction to CO in Water: Carbon Nanotube–Gold Nanohybrid as a Selective and Efficient Electrocatalyst" *ChemSusChem* 9, no. 17 (2016): 2317–2320. doi:10.1002/cssc.201600597
- 2 Hendon, C. H., Bonnefoy, J., Quadrelli, E. A., Canivet, J., Chambers, M. B., Rousse, G., Walsh, A., Fontecave, M., and Mellot-Draznieks, C. "A Simple and Non-Destructive Method for Assessing the Incorporation of Bipyridine Dicarboxylates as Linkers within Metal-Organic Frameworks" *Chemistry - A European Journal* 22, no. 11 (2016): 3713–3718. doi:10.1002/chem.201600143

- 1 Borghetti, P., Meriggio, E., Rousse, G., Cabailh, G., Lazzari, R., and Jupille, J. "Photoemission Fingerprints for Structural Identification of Titanium Dioxide Surfaces" *The Journal of Physical Chemistry Letters* 7, no. 16 (2016): 3223–3228. doi:10.1021/acs.jpcl.6b01301

Communications orales invitées

Journées de la division Chimie du Solide, Société Chimique de France, 19-22 novembre 2021
Li-ion batteries materials: the power of powder diffraction, invited talk

In-situ and operando diffraction studies of Li ion battery electrodes
G. Rousse, Keynote
IUCr International Union of Crystallography, Prague, 14-22 août 2021

Li-ion batteries materials: the use of powder diffraction
G. Rousse, Invited (audience: 50)
Le Studium, Tours, France 22-24 janvier 2020

Towards a better understanding of battery materials via powder diffraction
G. Rousse, Plenary (audience: 60)
Annual meeting de la Société Suisse de Cristallographie, Sion, Suisse, 4 septembre 2019

Towards a better understanding of battery materials via structural studies example on ruthenates
G. Rousse, Plenary
Power Our Future Conference, Vitoria-Gasteiz, Espagne, 2-6 juillet 2019

Batteries: a playground for crystallographers
G. Rousse, Plenary (audience: 450)
EPDIC 16 (European Powder Diffraction Conference), Edinburgh, UK, 1st-4th July 2018

The Rietveld Method
G. Rousse,
BCS 9th meeting (Comité national *belge* de *Cristallographie*), Bruxelles, 26th October 2016

ENCADREMENT DOCTORAL (*Direction de thèses*) :

- JACQUET Quentin 2015-2018
Doctorat de Sorbonne Université (ED397) ; Layered rocksalt derivatives for Li and Na batteries ; co-encadrement avec Jean-Marie Tarascon
- VACCARELLI Ornella 2015-2018
Doctorat de Sorbonne Université (ED564) ; Experimental and theoretical investigation of low-dimensional spin systems ; co-encadrement avec Guillaume Radtke (IMPIC, SU)
- PEARCE Paul 2016-2019
Doctorat de Sorbonne Université (ED397) ; Iridium based compounds : structure and electrochemistry ; co-encadrement avec Jean-Marie Tarascon
- SAHA Sujoy 2017-2020
Doctorat de Sorbonne Université (ED397) ; Solid state electrolytes ; co-encadrement avec Jean-Marie Tarascon
- MARCHANDIER Thomas 2018-2021
Doctorat de Sorbonne Université (ED397) ; Exploration of new ruthenates compounds. co-encadrement avec Jean-Marie Tarascon
- LOUIS Jacques 2020-2023

Doctorat de Sorbonne Université (ED397) ; Layered Sulfurs and Oxysulfurs. co-encadrement avec Jean-Marie Tarascon

PRIX ET DISTINCTIONS SCIENTIFIQUES OBTENUS AU COURS DE LA PÉRIODE (indiquer les dates) :

2019 : Prix « Jeune Chercheur », Division Chimie du Solide, Société Chimique de France

AUTRES OBSERVATIONS :

Acceptez-vous la mise en ligne de ce document sur le site internet de l'IUF : oui